



CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA $Y_{1.6}Ga_{0.4}(MoO_4)_3$ EM CONDIÇÕES DE PRESSÃO E TEMPERATURAS EXTREMAS

Victor Viana Oliveira¹, Waldeci Paraguassu Feio¹

¹Universidade Federal do Pará.

*E-mail: victor_viana02@hotmail.com, wparagua@gmail.com

Resumo

Neste trabalho é apresentada uma análise do sistema $Y_{1.6}Ga_{0.4}(MoO_4)_3$ submetido a condições de pressão e temperaturas extremas. A espectroscopia Raman foi a principal técnica de análise utilizada neste trabalho. Técnicas auxiliares como difração de Raios-x, microscopia eletrônica de varredura e cálculos ab initio também foram utilizadas. Em nossas análises, sugerimos que o material $Y_{1.6}Ga_{0.4}(MoO_4)_3$ cristaliza-se em estrutura ortorrômbica pertencendo ao grupo espacial Pbcn. Identificamos que a amostra é constituída por grãos compreendidos entre 1 μm e 10 μm em média. Medidas de espectroscopia Raman mostraram que o material apresenta, em condições ambientes, a presença de moléculas de água em sua estrutura, o que ocasiona um grande grau de desordem que é proporcional a quantidade de moléculas estruturais de água. Verificamos que acima de 84 °C ocorre uma transformação estrutural no material provocada pela saída das moléculas de água, o que leva ao aumento do grau de cristalinidade do material. Ocorre também o surgimento de um modo em torno de 878 cm^{-1} , modo este que não está presente no material não dopado com íons Gálio. Concluimos, juntamente com os resultados dos cálculos que este novo modo é referente a um estiramento simétrico dos grupos molibdatos próximos aos íons Gálio. Medidas em baixas temperaturas mostraram que a fase ortorrômbica do material não apresenta nem uma fase mais estável com energia próxima a esta que possa permitir uma transformação estrutural para um mínimo ainda menor de energia deste sistema. Nossas análises dos resultados de altas pressões na amostra hidratada sugerem que o material sofre um processo de amorfização induzida por pressão hidrostática que tem início em 4.8 GPa. Na amostra parcialmente hidratada verificou-se dois comportamentos descontínuos onde atribuímos a um processo de amorfização e também a presença de domínios na estrutura do material. Verificamos também que a presença de água na estrutura eleva a estabilidade das fases cristalinas, levando a estabilidade dos processos de amorfização a obedecerem a mesma ordem do grau de hidratação das amostras. As modificações causadas são irreversíveis. A transição de fase induzida por pressão hidrostática que é reportada na literatura para o material $Y_2(MoO_4)_3$ é suprimida devido ao alto grau de desordem no material $Y_{1.6}Ga_{0.4}(MoO_4)_3$ ocasionada pela presença de água em sua estrutura.

Palavras-chave: Molibdatos, Expansão Térmica Negativa, Espectroscopia Raman.